

**Математически модел на кристализация на многокомпонентна сплав при използване на наномодификатори**

**Сашо Попов<sup>1</sup>, В. Манолов<sup>1</sup>, П. Кузманов<sup>1</sup>, А. Черепанов<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> Институт по металознание и технология на металите,

<sup>2</sup> Институте по теоретична и приложна механика, РАН, Сибирско отделение.

Моделира се процесът на кристализация в малък образец, така че в първо приближение температурата зависи само от времето. Условието за баланс на топлината при неизотермична обемна кристализация води до следното уравнение за температурата  $T(t)$ :

$$C_p \rho V_0 \frac{dT}{dt} = L \rho \frac{dV}{dt} - \alpha F (T - T_f), \quad (1)$$

$V_0$  е началният обем на стопилката;

$V(t)$  е обемът на твърдата фаза в процеса на кристализация;

$F$  е вътрешната повърхнина на формата, в която се излива стопилката,

$T_f$  е температурата на формата;

$\alpha$  е коефициент на топлопренос;

$C_p$  е специфична топлоемност;

$\rho$  е плътност.

Известно е, че кристализацията на сплави започва при температура  $T$ , по-ниска от равновесната ликвидус температура  $T_l$ . Разликата  $\Delta T = T_l - T$  се нарича свръхохлаждане (overcooling). При  $n$ -компонентни сплави

$$\Delta T = T_l - T = T_A - f_i^{k-1} \sum_{i=1}^n \beta_i C_i - T, \quad (2) \quad T = T_A - \Delta T - f_i^{k-1} \sum_{i=1}^n \beta_i C_i \quad (3)$$

$C_i$  е концентрацията на  $i^{\text{th}}$  компонента на сплавта,  $\beta_i$  е коефициент;  $f_i$  е съдържанието на течната фаза в двуфазната зона;  $T_A$  е температурата на топене на основния метал;  $k$  е коефициент на разпределение.

Отношението  $V/V_0$  определя съдържанието на твърдата фаза в двуфазната зона

$$\frac{V}{V_0} = f_s = 1 - f_l = 1 - e^{-\omega}, \quad (4), \quad \omega = \varphi N \left( \int_0^t K_V \Delta T d\tau \right)^3. \quad (5)$$

$N$  е брой на центровете на кристализация,  $\varphi = 4\pi/3$ ,  $K_V$  е кристализационна константа.

От уравнения (1) - (5) получаваме:

$$\frac{d\Delta T}{dt} = \frac{F\alpha}{V_0\rho C_P} \left( T_A - T_f - \Delta T - f_i^{k-1} \sum_i \beta_i C_i \right) + \left( \frac{L}{C_P} + (1-k) f_i^{k-2} \sum_i \beta_i C_i \right) \frac{df_i}{dt}. \quad (6)$$

За стадия на охлаждане на сплавта от температурата  $T_0$  на заливане във формата до температурата ликвидус, т.е., в интервала  $T_0 \geq T \geq T_l$ , имаме  $f_l = e^{-\omega} = 1$ , и  $C_P \rho = C_{P_1} \rho_1$  и уравнението (1) става

$$\frac{dT}{dt} = -\frac{\alpha}{R\rho_1 C_{P_1}} (T - T_f), \quad R = V_0/F. \quad (7)$$

Началното условие за уравнение (7) е

$$T(0) = T_0. \quad (8)$$

В двуфазната зона  $T_l \geq T \geq T_e$ ,  $T_e$  е температурата на евтектичната кристализация, имаме  $C_P \rho = C_{P_2} \rho_2$  и уравнение (6) става

$$\frac{d\Delta T}{dt} = \frac{\alpha}{R\rho_2 C_{P_2}} \left[ T_A - T_f - \Delta T - (e^{-\omega})^{k-1} \sum_i \beta_i C_i \right] - \left[ \frac{L}{C_{P_2}} + (1-k)(e^{-\omega})^{k-2} \sum_i \beta_i C_i \right] e^{-\omega} \frac{d\omega}{dt} \quad (9)$$

Началното условие за него е:

$$\Delta T(t_l) = 0, \quad (10)$$

където  $t_l$  е времето, за което стопилката достига температурата ликвидус.

В интервала  $T_e \geq T \geq T_{end}$ ,  $T_{end}$  е крайната температура на охлаждане, имаме

$$\frac{V}{V_0} = \frac{V_{Se}}{V_0} = 1 - f_{le}. \quad \text{Тук } V_{Se} \text{ е обема на твърдата евтектика и } f_{le} \text{ е}$$

съдържанието на течната евтектика. Така уравнение (1) приема вида

$$C_{P_2} \rho_2 \frac{dT}{dt} = -L\rho_2 \frac{df_{le}}{dt} - \frac{\alpha}{R} (T - T_f), \quad (11) \quad f_{le} = e^{-K_e \int_{T_e}^T (T_e - T) dT} \quad (12)$$

с начално условие

$$T(t_e) = T_e, \quad (13)$$

$K_e$  е коефициент на кристализация на евтектиката и  $t_e$  е времето, за което стопилката достига евтектиката.

### 3. Решаване на математическия модел

I стадий – решава се уравнение (7) с начално условие (8) до достигане на температура  $T_l$  - определя се  $t_l$ .

II стадий: Решава се уравнение (9) с начално условие (10).

Указание: Може да се направи смяна на зависимата променлива  $\Delta T$ :

$$Q = \int_{t_l}^t \Delta T d\tau, \quad (14), \quad \text{откъдето} \quad \Delta T = \frac{dQ}{dt} \quad \text{и} \quad \frac{d\Delta T}{dt} = \frac{d^2 Q}{dt^2}, \quad (15)$$

$$\omega = \varphi NK_V^3 Q^3, \quad \frac{d\omega}{dt} = 3\varphi NK_V^3 Q^2 \frac{dQ}{dt}. \quad (16)$$

Заместваме (15) и (16) в (9):

$$\frac{d^2 Q}{dt^2} = \frac{\alpha}{R\rho_2 C_{P_2}} \left[ T_A - T_f - \frac{dQ}{dt} - e^{-(k-1)\varphi NK_V^3 Q^3} \sum_i \beta_i C_i \right] - \left[ \frac{L}{C_{P_2}} + (1-k)e^{-(k-2)\varphi NK_V^3 Q^3} \sum_i \beta_i C_i \right] e^{-\varphi NK_V^3 Q^3} 3\varphi NK_V^3 Q^2 \frac{dQ}{dt}. \quad (17)$$

От (14) и (15) получаваме начални условия за уравнение (17):

$$Q(t_l) = \int_{t_l}^{t_l} \Delta T d\tau = 0 \quad \text{и} \quad \left. \frac{dQ}{dt} \right|_{t=t_l} = \Delta T(t_l) = 0. \quad (18)$$

Така пресмятаме  $Q(t)$  and и след това  $T(t)$  по формула (3)

$$T = T_A - \frac{dQ}{dt} - e^{-(k-1)\varphi NK_V^3 Q^3} \sum_i \beta_i C_i. \quad (19)$$

III стадий. За решаване на уравнение (11) може да се направи смяната

$$P = \int_{t_e}^t (T_e - T) d\tau. \quad (20)$$

От (20) и (12) получаваме

$$T = T_e - \frac{dP}{dt}, \quad \frac{dT}{dt} = -\frac{d^2 P}{dt^2}, \quad \frac{df_e}{dt} = -K_e \frac{dP}{dt} e^{-K_e P}. \quad (21)$$

и уравнение (11) става

$$\frac{d^2 P}{dt^2} = \frac{\alpha}{R\rho_2 C_{P_2}} \left( T_e - \frac{dP}{dt} - T_f \right) - \frac{L}{C_{P_2}} K_e \frac{dP}{dt} e^{-K_e P}. \quad (22)$$

От (20) и (21) получаваме начални условия за (22).

$$P(t_e) = 0 \quad \text{и} \quad \left. \frac{dP}{dt} \right|_{t=t_e} = 0. \quad (23)$$

Решаваме (22) с начално условие (23), получаваме  $P(t)$ , после  $T(t)$  от (21).

**Входни параметри: сплав AlSi7Mg**

$$V = 4.6304 \times 10^{-5} \text{ m}^3, F = 0.726 \times 10^{-2} \text{ m}^2, R = \frac{V}{F} = 0.006375 \text{ m}, \rho_1 = 2600 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3},$$

$$\rho_2 = 2450 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}, C_{p1} = 1000 \frac{\text{J}}{\text{kgK}}, C_{p2} = 1050 \frac{\text{J}}{\text{kgK}}, T_0 = 933 \text{ K}, T_i = 880.7 \text{ K}, T_e = 857 \text{ K},$$

$$T_{end} = 550 \text{ K},$$

$$\beta = \sum_{i=1}^2 \beta_i C_i = 52.3 \text{ K}, k = 0.14, L = 4.02 \times 10^5 \frac{\text{J}}{\text{kg}}, \varphi = \frac{4\pi}{3}, T_A = 933 \text{ K},$$

$$\text{for } 0 \leq t \leq 29.43 \text{ s } \alpha = 48 \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \text{ K}}, \text{ for } 29.43 < t \leq 89.51 \text{ s } \alpha = 75 \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \text{ K}},$$

$$\text{for } 89.51 < t \leq 231.93 \text{ s } K_e = 0.005 \frac{1}{\text{Ks}} \text{ и } \alpha = 85 \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \text{ K}}.$$

**В случая без наночастици:**

$$N = 3.327 \times 10^8 \frac{1}{\text{m}^3}, K_v = 0.0001515 \frac{\text{m}}{\text{sK}},$$

**В случая с наночастици:**

$$N = 2.562 \times 10^9 \frac{1}{\text{m}^3}, K_v = 0.0001508 \frac{\text{m}}{\text{sK}}.$$

#### 4. Results from the solution of the mathematical model

Mathematical model (7)–(13) has been solved for cylindrical specimen of diameter 34 mm and height 51 mm of alloy AlSi7Mg without NM and with NM. The result after calculating the temperature according to the mathematical model is shown in Fig. 1. The input data about the model are given below the figure. The figure shows that the minimum due to the overcooling is 1.45 K for the case without NM and 0.95 K for the case with NM (cf. the macro graph in Fig. 1). This is due to the increased number of the crystallization centers after introducing NM. The experimental verification of these results is forthcoming.

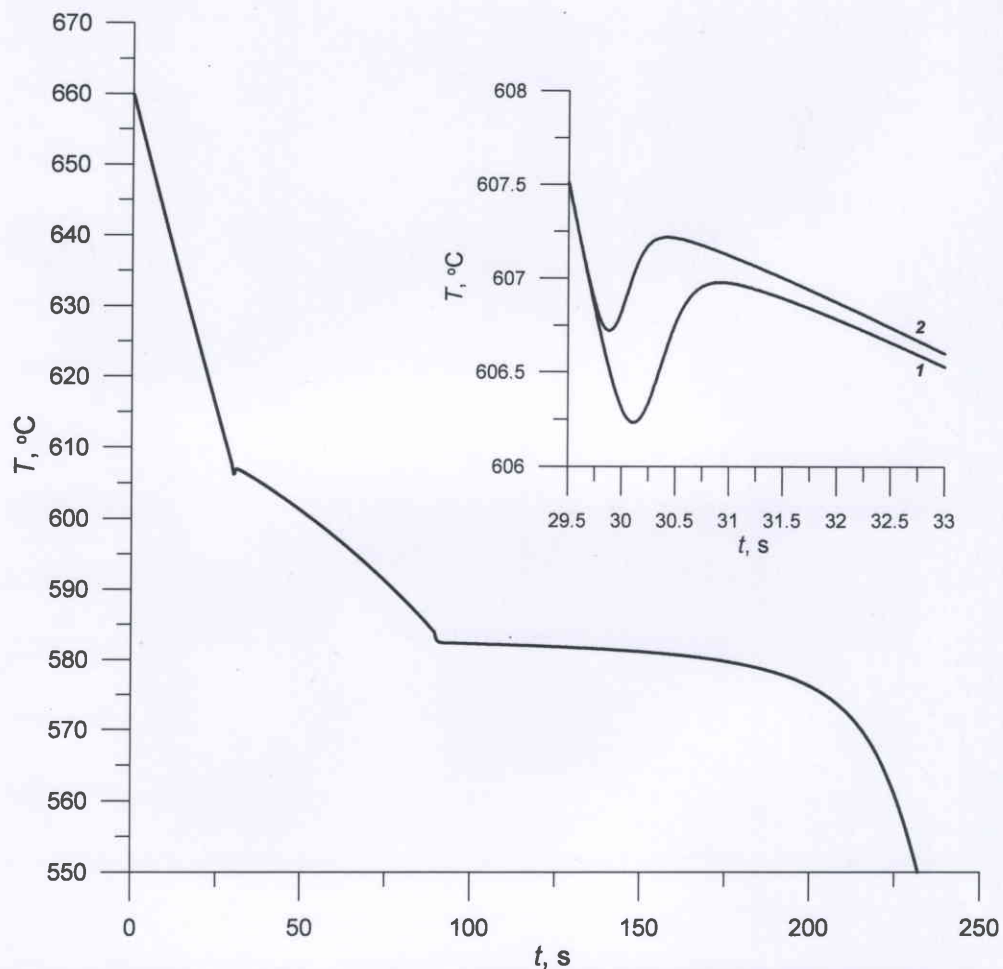


Fig. 1. Temperature dependence on the time in the range from the temperature of casting to the temperature of crystallization completion. Alloy AlSi7Mg: 1 - without NM, 2 - with NM.